

УДК 621.039.051:532.517.4

ЭФФЕКТИВНЫЙ МЕТОД РЕШЕНИЯ ПЛОХО ОБУСЛОВЛЕННЫХ ТРЕХМЕРНЫХ УРАВНЕНИЙ ЭЛЛИПТИЧЕСКОГО ТИПА НА ПРИМЕРЕ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ СТЕФАНА ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ РАСПЛАВОВ

В. П. Гинкин, О. М. Гинкина, С. М. Ганина, К. Г. Чернов, С. В. Пупко, А. Б. Кагаленко
(ГНЦ РФ-ФЭИ, г. Обнинск)

Разработан новый эффективный метод CGPIF для решения систем трехмерных конечно-разностных уравнений эллиптического типа с симметричными плохо обусловленными матрицами коэффициентов. Для решения несимметричных задач предложен двухуровневый итерационный метод с использованием на внутренних итерациях метода CGPIF. Выполнены исследования скорости сходимости предложенного метода на тестовых задачах Дирихле и Неймана для уравнений диффузионного и диффузионно-конвективного типов. Предлагается новая математическая модель решения задачи Стефана в энтальпийных переменных совместно с конвективным тепломассопереносом в жидкой фазе. Приводятся результаты расчетов экспериментальных бенчмарков по кристаллизации расплавов, демонстрирующие адекватность модели.

Введение

При решении сложных пространственно-временных задач, в частности задач тепломассопереноса при наличии фазовых переходов, связанных с плавлением или кристаллизацией, необходимо использовать очень подробные разностные сетки и малые шаги по времени. Поэтому критичным является выбор итерационного метода для решения получающихся конечно-разностных систем линейных уравнений с разреженными матрицами большой размерности, которые приходится решать многократно. Это особенно важно при решении сильно нелинейных задач, так как к большому количеству временных шагов добавляются итерации по нелинейности на каждом временном шаге, которые выполняются до установления решения с заданной точностью.

При решении симметричных задач хорошо зарекомендовал себя метод неполной факторизации, если он используется в качестве предобуславливателя в методе сопряженных градиентов. В данной работе предложены и численно исследованы на решении тестовых задач Дирихле, Неймана—Дирихле и чистой задачи Неймана для уравнения Пуассона два новых варианта этого метода, используемые в качестве предобуславливателей в методе сопряженных градиентов. Показана высокая эффективность этого метода при использовании до 10 млн. узлов разностной сетки.

Одной из наиболее трудных для моделирования задач является процесс тепломассопереноса при наличии движущегося (или неподвижного) фазового перехода с учетом конвективного течения в жидкой фазе. К таким процессам относится, в частности, выращивание кристаллов из расплава горизонтальным методом Бриджмена. Высокое качество выращиваемых кристаллов зависит от скорости кристаллизации и градиентов температур вблизи границы фазового перехода. Эти условия проявляются и в изменении формы границы фазового перехода. Путем математического моделирования можно заранее определить как конструктивные особенности установки для выращивания кристаллов, так и режимы работы ее узлов, с тем чтобы обеспечить выполнение необходимых технологических требований.

Для верификации таких математических моделей и программ расчета были выполнены специальные тестовые бенчмарк-эксперименты на установке Бриджмена. Однако несмотря на относительную

простоту геометрии ампулы с кристаллизующимся материалом, позволяющую использовать при моделировании процесса декартовы координаты, публикаций по расчетам этих бенчмарков практически нет. Видимо, это вызвано достаточно высоким уровнем сложности решения данной задачи.

В настоящей работе приведены результаты расчетов упомянутых бенчмарков по разработанному в ГНЦ РФ-ФЭИ комплексу программ GIGAN, которые продемонстрировали адекватность модели и пригодность ее для использования в практических расчетах.

1. Предобуславливание методом неполной факторизации

Пусть требуется решить уравнение

$$Ay = f, \quad (1)$$

где A — конечно-разностный оператор, аппроксимирующий уравнение эллиптического типа. Пусть оператор A действителен и симметричен, т. е. $A = A^T$. Для решения этого уравнения используем метод сопряженных градиентов с предобуславливателем:

$$r^j = Ay^{j-1} - f; \quad z^j = K^{-1}r^j; \quad g^j = z^j - b^j g^{j-1}; \quad y^j = y^{j-1} - a^j g^j;$$

$$b^j = \begin{cases} 0, & j = 1; \\ \frac{(Az^{j-1}, g^{j-1})}{(Ag^{j-1}, g^{j-1})}, & j > 1; \end{cases} \quad a^j = \frac{(r^{j-1}, g^j)}{(Ag^j, g^j)}.$$

В качестве предобуславливающей матрицы K выберем матрицу из метода неполной факторизации. Метод неполной факторизации для этого случая имеет следующий вид:

$$(A + B)y = f + By, \quad (2)$$

где матрица B выбирается такой, чтобы матрица $A + B$ представлялась в виде произведения легко обратимых матриц:

$$A + B = MN.$$

Так как матрица A симметрична, то логично выбрать $N = M^T$, где M^T — транспонированная матрица. Тогда уравнение (2) представляется в виде системы двух уравнений, которая решается методом последовательных приближений:

$$Mz = f + By^{j-1};$$

$$M^T y^j = z \quad (j = 1, 2, \dots). \quad (3)$$

В методе неполной факторизации матрица B выбирается, а матрица M получается.

Пусть матрица A имеет 9-диагональный вид, соответствующий разностной аппроксимации трехмерного уравнения типа диффузии на 9-точечном шаблоне:

$$Ay = -ay_{i-1} - by_{k-1} - gy_{l-1} - ry_{i-1,k+1} - a_{i+1}y_{i+1} - b_{k+1}y_{k+1} - g_{l+1}y_{l+1} - r_{i+1,k-1}y_{i+1,k-1} + py;$$

$$a_1 = a_{n_1+1} = 0; \quad b_1 = b_{n_2+1} = 0; \quad g_1 = g_{n_3+1} = 0; \quad r_1 = r_{n_2+1} = r_1 = r_{n_2+1} = 0;$$

$$a \geq 0; \quad b \geq 0; \quad g \geq 0; \quad r \geq 0; \quad p > 0; \quad p \geq a + b + g + r + a_{i+1} + b_{k+1} + g_{l+1} + r_{i+1,k-1};$$

$$i = 1, \dots, n_1; \quad k = 1, \dots, n_2; \quad l = 1, \dots, n_3.$$

Здесь и далее тройной индекс i, k, l для простоты записи опускаем и оставляем только ту часть индекса, которая отличается от i, k, l .

Выберем оператор M в виде нижней 5-диагональной матрицы:

$$Mz = pz - \alpha z_{i-1} - \beta z_{k-1} - \gamma z_{l-1} - \lambda z_{i-1,k+1}, \quad (5)$$

где $\rho, \alpha, \beta, \gamma, \lambda$ — пока неопределенные коэффициенты. Тогда оператор M^T будет верхней 5-диагональной матрицей:

$$M^T y = \rho y - \alpha_{i+1} y_{i+1} - \beta_{k+1} y_{k+1} - \gamma_{l+1} y_{l+1} - \lambda_{i+1, k-1} y_{i+1, k-1}.$$

Выражения (3), (5) однозначно определяют схему неполной факторизации для решения уравнения (1) с матрицей A вида (4), если определен оператор B . Чтобы определить его, найдем сначала вид факторизованного оператора MM^T :

$$\begin{aligned} MM^T y &= \rho(\rho y - \alpha_{i+1} y_{i+1} - \beta_{k+1} y_{k+1} - \gamma_{l+1} y_{l+1} - \lambda_{i+1, k-1} y_{i+1, k-1}) - \\ &- \alpha(\rho_{i-1} y_{i-1} - \alpha y - \beta_{i-1, k+1} y_{i-1, k+1} - \gamma_{i-1, l+1} y_{i-1, l+1} - \lambda_{k-1} y_{k-1}) - \\ &- \beta(\rho_{k-1} y_{k-1} - \alpha_{i+1, k-1} y_{i+1, k-1} - \beta y - \gamma_{k-1, l+1} y_{k-1, l+1} - \lambda_{i+1, k-2} y_{i+1, k-2}) - \\ &- \gamma(\rho_{l-1} y_{l-1} - \alpha_{i+1, l-1} y_{i+1, l-1} - \beta_{k+1, l-1} y_{k+1, l-1} - \gamma y - \lambda_{i+1, k-1, l-1} y_{i+1, k-1, l-1}) - \\ &- \lambda(\rho_{i-1, k+1} y_{i-1, k+1} - \alpha_{k+1} y_{k+1} - \beta_{i-1, k+2} y_{i-1, k+2} - \gamma_{i-1, k+1, l+1} y_{i-1, k+1, l+1} - \lambda y). \end{aligned} \quad (6)$$

По определению это выражение равно $(A + B)y$. Вычитая (4) из (6), находим явный вид итерированного оператора $B y = (MM^T - A)y$:

$$\begin{aligned} B y &= (MM^T - A)y = (\rho^2 + \alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2 - p)y - (\alpha\rho_{i-1} - a)y_{i-1} - \\ &- (\rho\alpha_{i+1} - a_{i+1})y_{i+1} - (\beta\rho_{k-1} - \alpha\lambda_{k-1} - b)y_{k-1} - (\rho\beta_{k+1} - \lambda\alpha_{k+1} - b_{k+1})y_{k+1} - \\ &- (\gamma\rho_{l-1} - g)y_{l-1} - (\rho\gamma_{l+1} - g_{l+1})y_{l+1} - (\lambda\rho_{i-1, k+1} - \alpha\beta_{i-1, k+1} - r)y_{i-1, k+1} - \\ &- (\rho\lambda_{i+1, k-1} - \beta\alpha_{i+1, k-1} - r_{i+1, k-1})y_{i+1, k-1} + \alpha\gamma_{i-1, l+1} y_{i-1, l+1} + \gamma\alpha_{i+1, l-1} y_{i+1, l-1} + \\ &+ \beta\gamma_{k-1, l+1} y_{k-1, l+1} + \gamma\beta_{k+1, l-1} y_{k+1, l-1} + \beta\lambda_{i+1, k-2} y_{i+1, k-2} + \lambda\beta_{i-1, k+2} y_{i-1, k+2} + \\ &+ \lambda\gamma_{i-1, k+1, l+1} y_{i-1, k+1, l+1} + \gamma\beta_{i+1, k-1, l-1} y_{i+1, k-1, l-1}. \end{aligned} \quad (7)$$

Отсюда видно, что оператор B определен на 17-точечном шаблоне. За счет последних восьми членов в (7), выходящих за рамки исходного 9-точечного шаблона (4), выражение для $B y$ не может быть сделано тождественно равным нулю, что привело бы к полной факторизации и безытерационному процессу в (3). Однако можно ввести компенсацию этих восьми членов таким образом, чтобы выражение для $B y$ обращалось в нуль на некоторых подмножествах функций y , в частности на функциях $y = \text{const}$.

Выберем компенсирующие члены так, чтобы итерированное выражение для $B y$ приняло вид

$$\begin{aligned} B y &= \alpha\gamma_{i-1, l+1} (y_{i-1, l+1} - \theta y_{l+1}) + \theta\alpha_{l-1}\gamma_{i-1} (y - y_{l-1}) + \\ &+ \gamma\alpha_{i+1, l-1} (y_{i+1, l-1} - \theta y_{i+1}) + \theta\alpha_{l-1}\gamma_{i-1} (y - y_{i-1}) + \\ &+ \beta\gamma_{k-1, l+1} (y_{k-1, l+1} - \theta y_{l+1}) + \theta\beta_{l-1}\gamma_{k-1} (y - y_{l-1}) + \\ &+ \gamma\beta_{k+1, l-1} (y_{k+1, l-1} - \theta y_{k+1}) + \theta\beta_{l-1}\gamma_{k-1} (y - y_{k-1}) + \\ &+ \beta\lambda_{i+1, k-2} (y_{i+1, k-2} - \theta y_{i+1, k-1}) + \theta\beta_{i-1, k+1}\lambda_{k-1} (y - y_{i-1, k+1}) + \\ &+ \lambda\beta_{i-1, k+2} (y_{i-1, k+2} - \theta y_{k+1}) + \theta\beta_{i-1, k+1}\lambda_{k-1} (y - y_{k-1}) + \\ &+ \lambda\gamma_{i-1, k+1, l+1} (y_{i-1, k+1, l+1} - \theta y_{l+1}) + \theta\lambda_{l-1}\gamma_{i-1, k+1} (y - y_{l-1}) + \\ &+ \gamma\lambda_{i+1, k-1, l-1} (y_{i+1, k-1, l-1} - \theta y_{i+1, k-1}) + \theta\lambda_{l-1}\gamma_{i-1, k+1} (y - y_{i-1, k+1}), \end{aligned} \quad (8)$$

где θ — итерационный параметр. При $\theta = 0$ компенсация отсутствует; при $\theta = 1$ компенсация полная (т. е. $B y = 0$, если y — константа); при $0 < \theta < 1$ компенсация частичная. Отметим, что случай $\theta = 0$ соответствует неполной факторизации Холецкого.

Потребуем теперь, чтобы выражение (8) тождественно совпало с (7). Для этого вычтем (8) из (7) и разность приравняем нулю. Группируя члены, получаем:

$$\begin{aligned} 0 &= \left[\rho^2 + \alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2 + \lambda^2 - p - 2\theta(\alpha_{l-1}\gamma_{i-1} + \beta_{l-1}\gamma_{k-1} + \beta_{i-1, k+1}\lambda_{k-1} + \lambda_{l-1}\gamma_{i-1, k+1}) \right] y - \\ &- (\alpha\rho_{i-1} - a - \theta\alpha_{l-1}\gamma_{i-1}) y_{i-1} - \left[\beta\rho_{k-1} - \alpha\lambda_{k-1} - b - \theta(\beta_{l-1}\gamma_{k-1} + \beta_{i-1, k+1}\lambda_{k-1}) \right] y_{k-1} - \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & - \left[\gamma \rho_{l-1} - g - \theta (\alpha_{l-1} \gamma_{i-1} + \beta_{l-1} \gamma_{k-1} + \lambda_{l-1} \gamma_{i-1, k+1}) \right] y_{l-1} - \\
 & - \left[\lambda \rho_{i-1, k+1} - \alpha \beta_{i-1, k+1} - r - \theta (\beta_{i-1, k+1} \lambda_{k-1} + \lambda_{l-1} \gamma_{i-1, k+1}) \right] y_{i-1, k+1} - \\
 & - (\rho \alpha_{i+1} - a_{i+1} - \theta \gamma \alpha_{i+1, l-1}) y_{i+1} - \left[\rho \beta_{k+1} - \lambda \alpha_{k+1} - b_{k+1} - \theta (\gamma \beta_{k+1, l-1} + \lambda \beta_{i-1, k+2}) \right] y_{k+1} - \\
 & - \left[\rho \gamma_{l+1} - g_{l+1} - \theta (\alpha \gamma_{i-1, l+1} + \beta \gamma_{k-1, l+1} + \lambda \gamma_{i-1, k+1, l+1}) \right] y_{l+1} - \\
 & - \left[\rho \lambda_{i+1, k-1} - \beta \alpha_{i+1, k-1} - r_{i+1, k-1} - \theta (\beta \lambda_{i+1, k-2} + \gamma \lambda_{i+1, k-1, l-1}) \right] y_{i+1, k-1}.
 \end{aligned} \tag{9}$$

Для того чтобы тождество (9) выполнялось, нужно в нем приравнять нулю все коэффициенты при значениях функции y . Решая полученную систему относительно неопределенных коэффициентов $\rho, \alpha, \beta, \gamma, \lambda$, задающих матрицу M в выражении (5), получаем формулы для вычисления этих коэффициентов. На самом деле, учитывая симметричность матрицы B , достаточно приравнять нулю только первые пять коэффициентов в выражении (9). В результате получаем систему пяти уравнений, решая которую, находим рекуррентные формулы для вычисления неопределенных коэффициентов $\rho, \alpha, \beta, \gamma, \lambda$:

$$\begin{aligned}
 \rho &= \sqrt{p - \alpha^2 - \beta^2 - \gamma^2 - \lambda^2 + 2\theta (\alpha_{l-1} \gamma_{i-1} + \beta_{l-1} \gamma_{k-1} + \beta_{i-1, k+1} \lambda_{k-1} + \lambda_{l-1} \gamma_{i-1, k+1})}; \\
 \alpha &= (a + \theta \alpha_{l-1} \gamma_{i-1}) / \rho_{i-1}; \\
 \beta &= (b + \alpha \lambda_{k-1} + \theta (\beta_{l-1} \gamma_{k-1} + \beta_{i-1, k+1} \lambda_{k-1})) / \rho_{k-1}; \\
 \gamma &= (g + \theta (\alpha_{l-1} \gamma_{i-1} + \beta_{l-1} \gamma_{k-1} + \lambda_{l-1} \gamma_{i-1, k+1})) / \rho_{l-1}; \\
 \lambda &= (r + \alpha \beta_{i-1, k+1} + \theta (\beta_{i-1, k+1} \lambda_{k-1} + \lambda_{l-1} \gamma_{i-1, k+1})) / \rho_{i-1, k+1}.
 \end{aligned} \tag{10}$$

Полученную схему неполной факторизации (3), (5), (8) для матрицы A вида (4) будем называть *схемой с периферийной компенсацией итерлируемых членов* и обозначать как PIF. При этом формулы для вычисления неопределенных коэффициентов $\rho, \alpha, \beta, \gamma, \lambda$ имеют вид (10). Сочетание метода сопряженных градиентов со схемой PIF будем обозначать как CGPIF.

Запишем теперь схему неполной факторизации с диагональной компенсацией итерлируемых членов, как это делал Н. И. Булеев для случая трехмерных разностных уравнений с 7-диагональными матрицами A [1]. Компенсация итерлируемых членов в схеме Булеева выбирается в виде диагональной матрицы, элементы которой равны суммам внедиагональных элементов матрицы B по соответствующим строкам, с итерационным параметром θ . В отличие от (8) оператор B в такой схеме имеет вид

$$\begin{aligned}
 By &= \alpha \gamma_{i-1, l+1} (y_{i-1, l+1} - \theta y) + \gamma \alpha_{i+1, l-1} (y_{i+1, l-1} - \theta y) + \\
 & + \beta \gamma_{k-1, l+1} (y_{k-1, l+1} - \theta y) + \gamma \beta_{k+1, l-1} (y_{k+1, l-1} - \theta y) + \\
 & + \beta \lambda_{i+1, k-2} (y_{i+1, k-2} - \theta y) + \lambda \beta_{i-1, k+2} (y_{i-1, k+2} - \theta y) + \\
 & + \lambda \gamma_{i-1, k+1, l+1} (y_{i-1, k+1, l+1} - \theta y) + \gamma \lambda_{i+1, k-1, l-1} (y_{i+1, k-1, l-1} - \theta y).
 \end{aligned} \tag{11}$$

В этом случае формулы для вычисления неопределенных коэффициентов примут более простой, чем в (10), вид:

$$\begin{aligned}
 \rho &= \sqrt{p - \alpha^2 - \beta^2 - \gamma^2 - \lambda^2 + 2\theta (\alpha \gamma_{i-1, l+1} + \gamma \beta_{k+1, l-1} + \lambda \beta_{i-1, k+2} + \lambda \gamma_{i-1, l+1})}; \\
 \alpha &= \frac{a}{\rho_{i-1}}; \quad \beta = \frac{b + \alpha \lambda_{k-1}}{\rho_{k-1}}; \quad \gamma = \frac{g}{\rho_{l-1}}; \quad \lambda = \frac{r + \alpha \beta_{i-1, k+1}}{\rho_{i-1, k+1}}.
 \end{aligned} \tag{12}$$

Схему неполной факторизации (3), (5), (11) для матрицы A вида (4) в отличие от схемы PIF будем называть *схемой с диагональной компенсацией* и обозначать как DIF. При этом формулы для вычисления неопределенных коэффициентов $\rho, \alpha, \beta, \gamma, \lambda$ имеют вид (12). Сочетание метода сопряженных градиентов со схемой DIF будем обозначать как CGDIF.

Впервые предобуславливатели PIF и DIF, а также методы CGPIF и CGDIF для трехмерных разностных уравнений с 9-диагональной матрицей A вида (4) были предложены в работе [2].

2. Тестирование метода

Для проверки эффективности предложенных методов решались следующие тестовые задачи:

1. Задача Дирихле для однородного уравнения $Ay = 0$ с постоянными коэффициентами

$$a = b = g = r = 1; \quad p = 8;$$

$$i = 2, \dots, n_1 - 1; \quad k = 2, \dots, n_2 - 1; \quad l = 2, \dots, n_3 - 1.$$

2. Смешанная задача Дирихле—Неймана для однородного уравнения $Ay = 0$ с постоянными коэффициентами с условиями Дирихле на одной плоскости и условиями Неймана на всех остальных границах.

Точные решения этих задач равны нулю.

В качестве начального приближения выбиралась функция

$$y = 300 + 200 \cdot (-1)^{ikl} + \cos i\pi h \cos k\pi h \cos l\pi h,$$

где $h = 1/n$ — шаг сетки, $n = n_1 = n_2 = n_3$. Итерации заканчивались при достижении заданной точности по критерию

$$\varepsilon_j = \max_{i,k,l} |y^j| < 10^{-4},$$

где j — номер итерации.

Тестовые задачи решались при разных значениях итерационного параметра $0 \leq \theta \leq 1$.

На рис. 1 приведены зависимости убывания нормы ошибки ε_j при решении трехмерной задачи Дирихле по методам CGDIF и CGPIF при числе узлов по одному направлению $n = 64$ и разных значениях итерационного параметра θ . Эти кривые показывают, что на первых итерациях скорость сходимости по обеим схемам при $\theta = 1$ выше, чем при $\theta = \theta_{\text{опт}}$. Однако уже при $\varepsilon_j < 0$ картина меняется на противоположную.

На рис. 2 приведены зависимости убывания нормы ошибки ε_j при решении смешанной трехмерной задачи Неймана—Дирихле по методам CGDIF и CGPIF при числе узлов по одному направлению $n = 64$ и разных значениях итерационного параметра θ . Видно, что для решения смешанной задачи Неймана—Дирихле при оптимальных значениях θ требуется примерно в 2 раза больше итераций, чем для решения задачи Дирихле.

Результаты численных исследований показали, что использование схем PIF и DIF в качестве предобуславливателей в методе сопряженных градиентов приводит к значительному ускорению сходимости этого метода. Так, например, при оптимальных значениях итерационного параметра θ , при числе узлов $n = 64$ по одному направлению число итераций для достижения заданной точности по схемам CGPIF и CGDIF уменьшилось при решении задачи Дирихле в 8,4 и 7,5 раза соответственно, а при решении задачи Неймана—Дирихле — в 8,1 и 3,7 раза соответственно.

На рис. 3, 4 приведены зависимости спектрального радиуса ρ_s оператора перехода итерационного процесса, вычисляемого по формуле $\rho_s = \lim_{j \rightarrow \infty} \left| \frac{\varepsilon_j}{\varepsilon_0} \right|^{1/j}$, от итерационного параметра θ и числа узлов n по одному направлению, полученные при решении вышеупомянутых задач методами CGPIF и CGDIF.

Полученные данные свидетельствуют о том, что параметр θ по-разному влияет на скорость сходимости схем CGPIF и CGDIF. Для метода CGPIF характер зависимостей $\rho_s(\theta)$ одинаковый как для задачи Дирихле, так и для задачи Дирихле—Неймана. Они имеют острый минимум при значениях θ , близких к единице, который сдвигается вправо с возрастанием числа узлов n . Для схемы CGDIF эти зависимости значительно более гладкие, а в случае смешанной задачи Дирихле—Неймана минимума практически не наблюдается. Следовательно, чем хуже обусловлена задача, тем метод CGPIF эффективнее метода CGDIF.

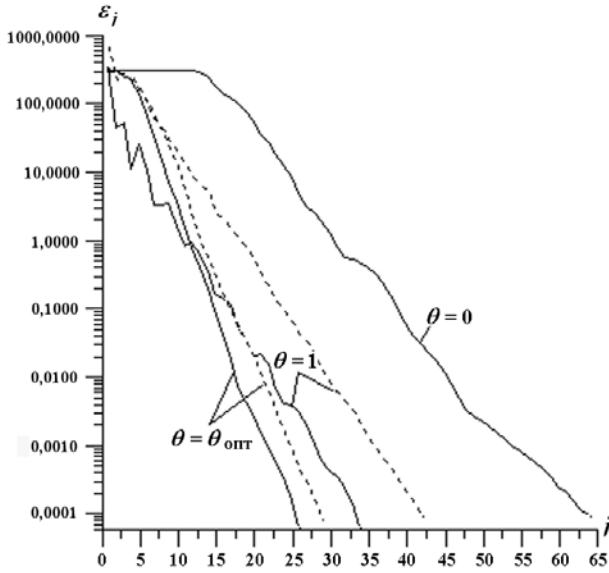


Рис. 1. Убывание нормы ошибки ε_j для задачи Дирихле: --- CGDIF; — CGPIF

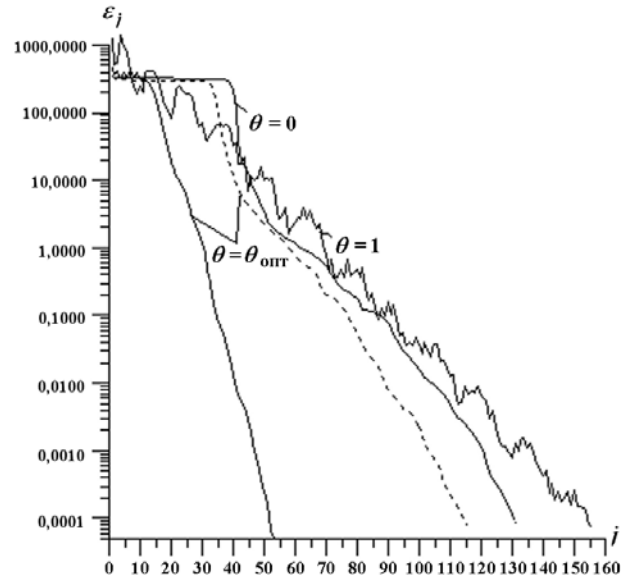


Рис. 2. Убывание нормы ошибки ε_j для задачи Неймана—Дирихле: --- CGDIF; — CGPIF

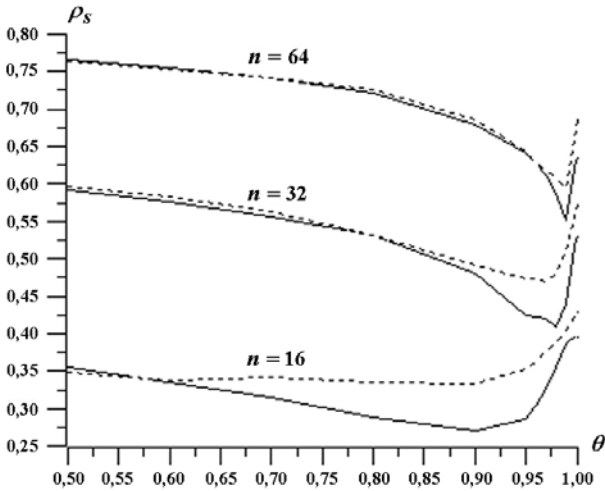


Рис. 3. Спектральный радиус матрицы перехода ρ_s для задачи Дирихле: --- CGDIF; — CGPIF

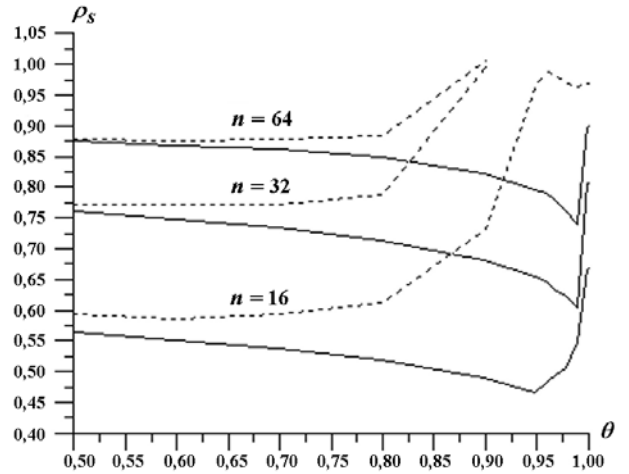


Рис. 4. Спектральный радиус матрицы перехода ρ_s для задачи Неймана—Дирихле: --- CGDIF; — CGPIF

Рассмотрим неоднородную тестовую задачу $Ay = f$ ($f \neq 0$), где A — разностный аналог оператора Лапласа. При решении неоднородной задачи для оценки точности приближенного решения выбирался следующий критерий:

$$\varepsilon_j = \sqrt{\frac{(r^j, r^j)}{(f, f)}} < eps,$$

где $r^j = Ay^j - f$ — невязка j -го приближения; eps — заданная точность решения.

В качестве начального приближения выбиралось $y = 0$. Решались задачи Дирихле и Неймана в области $-1 < x_1, x_2, x_3 < 1$; функция f выбиралась такой, чтобы решение имело вид

$$y = (1 + \cos \pi x_1) (1 + \cos \pi x_2) (1 + \cos \pi x_3).$$

В случае задачи Неймана матрица A вырождена, а решение задачи $Ay = f$ определено с точностью до аддитивной постоянной. Доопределим эту задачу дополнительным условием $y_{n_1, n_2, n_3} = 0$. Тогда решение задачи Неймана однозначно определено.

Обе задачи будем решать методом CGPIF с параметром $\theta = \sqrt{\frac{n-1}{n}} \approx 1 - \frac{1}{2n}$, где n — число узлов по одному направлению. Это выражение хорошо приближает экспериментальные зависимости оптимальных значений $\theta_{\text{опт}}$ от n как для задачи Дирихле, так и для задачи Неймана. Если количества узлов по направлениям разные, то выбирается максимальное из них. Для решения задачи Неймана используем метод CGPIF, не вводя вначале никаких дополнительных условий. После того как итерационный процесс сойдется с заданной точностью, из всех значений найденного решения один раз вычтем значение этого решения в угловой точке (n_1, n_2, n_3) , т. е. $y_{i,k,l} = y_{i,k,l} - y_{n_1, n_2, n_3}$. Получим искомое решение задачи Неймана с дополнительным условием $y_{n_1, n_2, n_3} = 0$.

На рис. 5, 6 приведены зависимости убывания погрешности от числа итераций j при разных значениях количества узлов n по одному направлению. Из этих результатов видно, что при $n = 215$, т. е. полном числе узлов $n^3 \sim 10$ млн., для уменьшения погрешности ϵ_j в 10^6 раз при решении задачи Дирихле потребовалось 52 итерации, а при решении задачи Неймана — 96 итераций, т. е. всего примерно в 2 раза больше, чем для задачи Дирихле.

На рис. 7 приведены зависимости числа итераций от числа узлов по одному направлению, а также аппроксимирующие их зависимости.

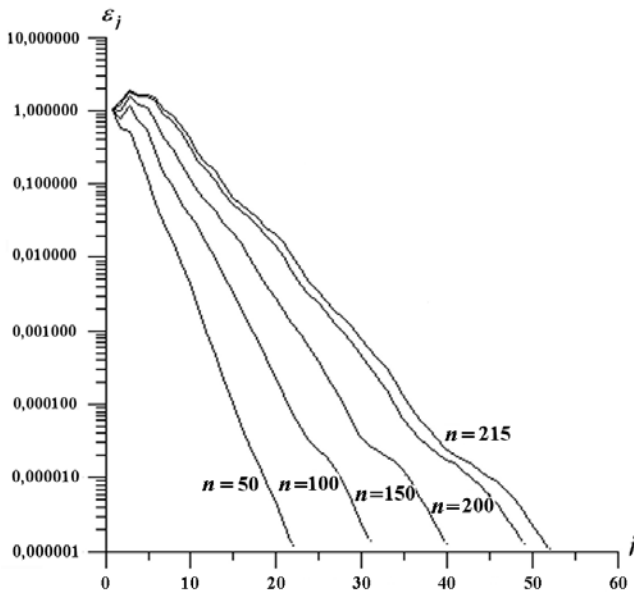


Рис. 5. Убывание ошибки при решении неоднородной задачи Дирихле

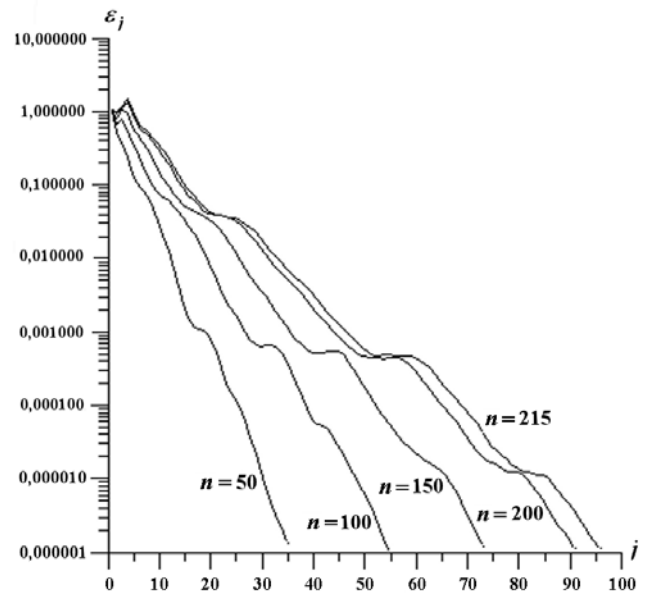


Рис. 6. Убывание ошибки при решении неоднородной задачи Неймана

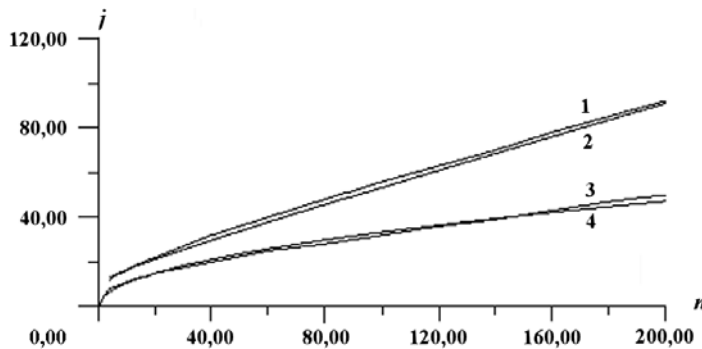


Рис. 7. Зависимость числа итераций от количества узлов: 1 — задача Неймана; 2 — зависимость $j = \sqrt{n} + n/3 + 10$; 3 — задача Дирихле; 4 — зависимость $j = 10/3\sqrt{n}$

3. Решение несимметричных задач

Если матрица A несимметрична, то она предварительно симметризуется:

$$A = A_S - A_N,$$

$$A_S = \frac{A^T + A}{2} + \tau I, \quad A_S = (A_S)^T; \quad A_N = \frac{A^T - A}{2} + \tau I, \quad A_N \neq (A_N)^T,$$

где τ — параметр; I — единичная матрица. Затем несимметричная часть переносится в правую часть уравнения и организуется внешний итерационный процесс:

$$A_S y^m = f + A_N y^{m-1} = f (y^{m-1})^T.$$

На каждом шаге внешних итераций m делается от одной до трех итераций по методу CGPIF.

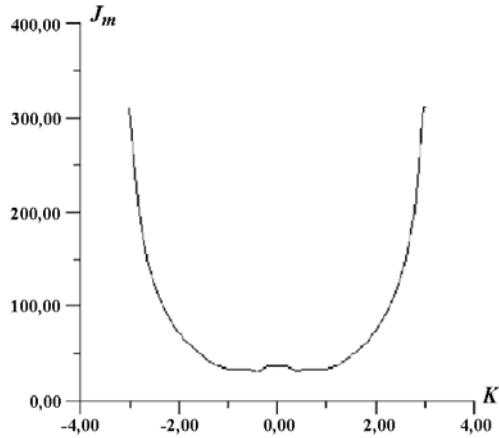


Рис. 8. Зависимость числа итераций J_m от K для несимметричных матриц

Такой двухуровневый итерационный метод тестировался на решении задачи диффузионно-конвективного типа. Решалась трехмерная задача Дирихле в кубе для уравнения вида $\Delta y + K \nabla y = f$. Значение K варьировалось. Число узлов $n_1 = n_2 = n_3 = 50$. Итерации заканчивались при достижении точности внешних итераций $\varepsilon_m < 10^{-6}$. Ограничение на число внутренних итераций по методу CGPIF на каждом шаге внешних итераций задавалось равным 3. После нескольких первых итераций требуемая точность достигалась за одну итерацию. Подсчитывалось полное число итераций J_m .

На рис. 8 приведена зависимость полного числа итераций от значения K . Расчеты показали, что при $-3 < K < 3$ оптимальное значение $\tau = 0$. При $|K| > 3$ необходимо введение $\tau > 0$, иначе не будет сходимости. Вопрос о выборе оптимального значения τ остается открытым.

4. Экспериментальные бенчмарки с фазовым переходом

Данный алгоритм был реализован в рамках комплекса программ GIGAN [3]. С целью верификации комплекса были просчитаны экспериментальные бенчмарки [4] с кристаллизацией полупроводникового материала $\text{NC}(\text{CH}_2)_2\text{CN}$ на горизонтальной установке Бриджмена в протяженной ампуле с прямоугольным сечением.

4.1. Описание экспериментов. Схема экспериментальной установки приведена на рис. 9. Геометрия ампулы с кристаллизующимся материалом приведена на рис. 10. Основной целью этих



Рис. 9. Схема установки Бриджмена

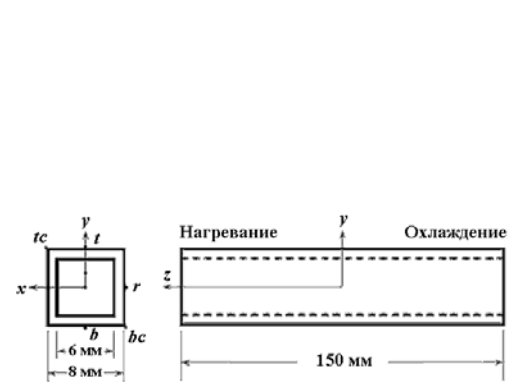


Рис. 10. Геометрия ампулы с кристаллизующимся материалом

экспериментов было измерение температур и форм границ фазового перехода для трех случаев: 1) стационарного, когда ампула не движется и граница фазового перехода находится приблизительно посередине ампулы; 2) с кристаллизацией материала в ампуле, когда ампула движется со скоростью 40 мкм/с в сторону более холодного конца; 3) с плавлением материала в ампуле, когда ампула движется со скоростью 40 мкм/с в сторону более горячего конца.

В этих экспериментах были измерены температурные распределения вдоль горизонтальных ребер и по центрам граней вдоль горизонтальной оси, температура по центру ампулы вдоль горизонтальной оси и координаты границ фазового перехода для всех трех случаев. Для стационарного случая измерены также координаты и скорости трех меченых частиц, движущихся в расплаве вблизи границы фазового перехода.

4.2. Математическая модель кристаллизации. В математической модели процесса кристаллизации рассматривается трехмерная нестационарная задача конвективного переноса тепла в гетерогенной среде с кусочно-непрерывными теплофизическими свойствами. Решается система уравнений Навье—Стокса для несжимаемой вязкой жидкости в приближении Буссинеска:

$$\begin{aligned}\rho \left(\frac{\partial h}{\partial t} + \vec{U} \nabla h \right) &= \nabla \lambda \nabla T; \\ \rho_0 \left(\frac{\partial \vec{U}}{\partial t} + (\vec{U} \nabla) \vec{U} \right) &= -\nabla p + \nabla \mu \nabla \vec{U} - \rho_0 \beta_T (T - T_0) \vec{g}; \\ \nabla \vec{U} &= 0,\end{aligned}$$

где h — удельная энтальпия; T — температура; \vec{U} — скорость течения; p — давление; ρ — плотность; λ — коэффициент теплопроводности; μ — вязкость; β_T — коэффициент температурного расширения; \vec{g} — гравитационное ускорение; ρ_0, T_0 — начальные значения плотности и температуры.

На границе фазового перехода ставится условие непрерывности температуры и условие Стефана:

$$T_+ - T_- = 0, \quad \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial n} \right)_+ - \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial n} \right)_- + \xi V_n = 0,$$

где ξ — скрытая теплота фазового перехода; n — единичный вектор нормали к границе фазового перехода; V_n — скорость движения границы фазового перехода в направлении нормали n . Подстрочные индексы $+$ и $-$ означают, что значения величин берутся на границе фазового перехода со стороны жидкой и твердой фаз соответственно. Координаты и форма границы фазового перехода определяются температурой кристаллизации и заранее неизвестны. Такая постановка задачи называется *задачей Стефана*.

Для решения уравнения теплопроводности в случае задачи Стефана удобно использовать энтальпийные переменные. Строятся (в общем случае неоднородные) конечно-разностные сетки. Значения энтальпии в узлах сетки однозначно определяют доли жидкой ε_L и твердой ε_S фаз в соответствующих ячейках сетки:

$$\varepsilon_L = \begin{cases} 0 & \text{для } h \leq h_1; \\ \frac{h - h_1}{\xi} & \text{для } h_1 < h < h_1 + \xi; \\ 1 & \text{для } h \geq h_1 + \xi; \end{cases} \quad \varepsilon_S = 1 - \varepsilon_L,$$

где h_1 — максимальное значение энтальпии твердой фазы.

Зависимость энтальпии от температуры имеет вид

$$h = h_1 + c_p (T - T^*) + \varepsilon_L \xi,$$

где c_p — теплоемкость вещества; T^* — температура кристаллизации.

Энтальпия, в отличие от температуры, является непрерывной функцией времени и координат во всей расчетной области, включая границу фазового перехода. В процессе решения уравнения теплопроводности в энтальпийных переменных не требуется вычислять нормаль к границе фазового перехода и скорость движения этой границы в направлении нормали. Условие Стефана при этом удовлетворяется автоматически. Правда, следует заметить, что граница фазового перехода при решении уравнения теплопроводности в энтальпийных переменных определена с точностью до шага сетки.

Уравнения гидродинамики записываются для всей расчетной области в целом, включая область твердой фазы, но при этом в ячейках с нулевой долей жидкой фазы скорость течения полагается равной нулю. Плотность материала определяется выражением $\rho = \rho_S \varepsilon_S + \rho_L \varepsilon_L$. Аналогично определяются теплоемкость и коэффициент теплопроводности.

Для аппроксимации различных компонент скоростей используются сетки, смещенные на полшага по соответствующим осям координат. Разностное уравнение для давления получается из уравнения неразрывности, записанного в разностном виде. Конвективные члены из уравнений движения исключаются с помощью экспоненциального преобразования. Данный алгоритм предложен и описан в работе [5]. В результате на каждом временном шаге получаются взаимосвязанные нелинейные несимметричные системы уравнений для расчета энтальпии и компонент скоростей с монотонными матрицами коэффициентов, а также симметричная система разностных уравнений с вырожденной матрицей коэффициентов для расчета давления, причем коэффициенты всех этих уравнений зависят от координат и претерпевают разрывы на границах зон с различными материалами и на границе фазового перехода.

Для решения полученных систем уравнений на каждом временном шаге используется неявный метод установления. Критерием выхода из итераций считается достижение относительного установления всех переменных h , \vec{U} , p в каждой расчетной точке с заданной точностью. После этого происходит переход к следующему временному шагу.

Для решения линеаризованных систем конечно-разностных уравнений для каждой переменной используется метод CGPIF. Несимметричные задачи перед решением предварительно симметризируются и решаются двухуровневым итерационным методом, описанным выше.

4.3. Сравнение расчетных и экспериментальных результатов. С использованием метода CGPIF были выполнены расчеты задач, соответствующих экспериментам, описанным в подразд. 4.1.

Рисунки 11–13 соответствуют стационарному случаю (случаю 1 из подразд. 4.1).

На рис. 11 приведены пространственное распределение энтальпии и изолинии энтальпии в вертикальном сечении ампулы при $x = 0$, где хорошо видна граница фазового перехода. Видно, что расчетная форма границы фазового перехода хорошо совпадает с экспериментальной.

На рис. 12 приведены расчетная и экспериментальная зависимости температуры от координаты z вдоль оси ампулы. Отмечается также хорошее совпадение расчета с экспериментом.

На рис. 13 приведены три траектории меченых частиц вблизи границы фазового перехода, измеренные экспериментально и полученные в расчетных полях скоростей течения расплава. Видно довольно хорошее совпадение расчетных и экспериментальных траекторий, что свидетельствует о близости реальных и расчетных распределений скорости течения расплава как по величине, так и по направлению.

На рис. 14 приведены пространственное распределение температуры и изотермы в вертикальном сечении ампулы при $x = 0$ для процесса кристаллизации (случай 2 из подразд. 4.1). Скорость движения ампулы вдоль оси z равна 40 мкм/с.

На рис. 15 приведены пространственное распределение температуры и изотермы в вертикальном сечении ампулы при $x = 0$ для процесса плавления (случай 3 из подразд. 4.1). Скорость движения ампулы вдоль оси z также равна 40 мкм/с.

Видно, что формы границ фазового перехода для всех трех случаев существенно различаются. В стационарном случае разность между максимальным и минимальным значениями координаты z границы фазового перехода составляет 3,5 мм. При кристаллизации она возрастает почти в 2 раза и достигает в эксперименте 7,2 мм. При плавлении она уменьшается до 1,8 мм. В целом для кристаллизации и плавления наблюдается качественное согласие экспериментальных и расчетных

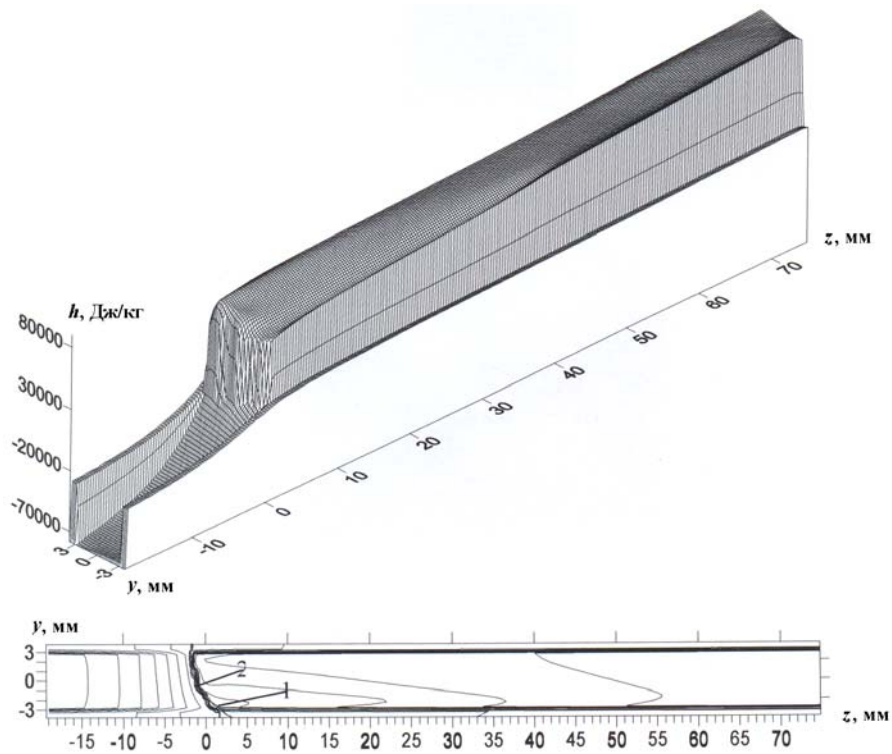


Рис. 11. Распределение энтальпии и изолинии для стационарного случая: 1 — эксперимент, 2 — расчет

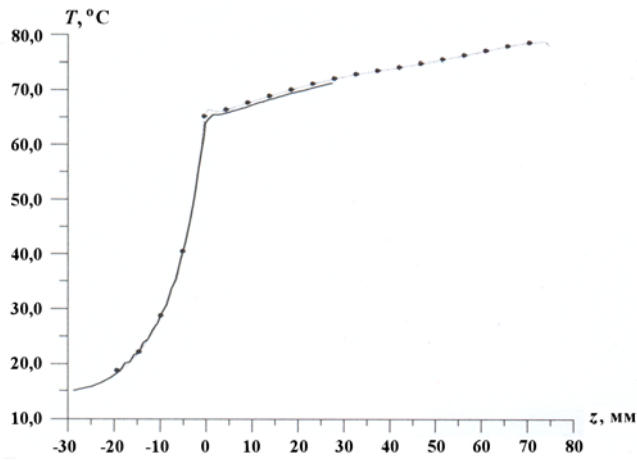


Рис. 12. График температуры вдоль оси z в центре ампулы $(z, 0, 0)$: — — эксперимент; $\dots \bullet \dots$ — расчет

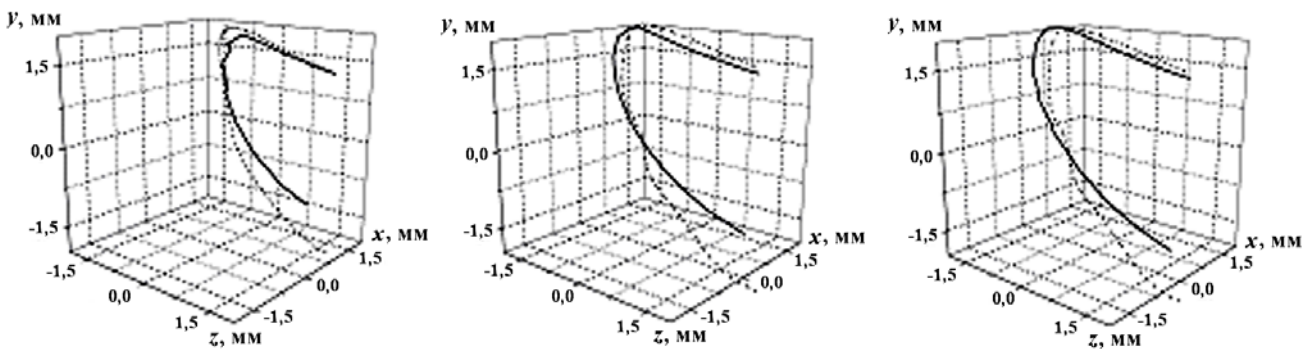


Рис. 13. Траектории меченых частиц (стационарное поле): — — эксперимент; - - - — расчет

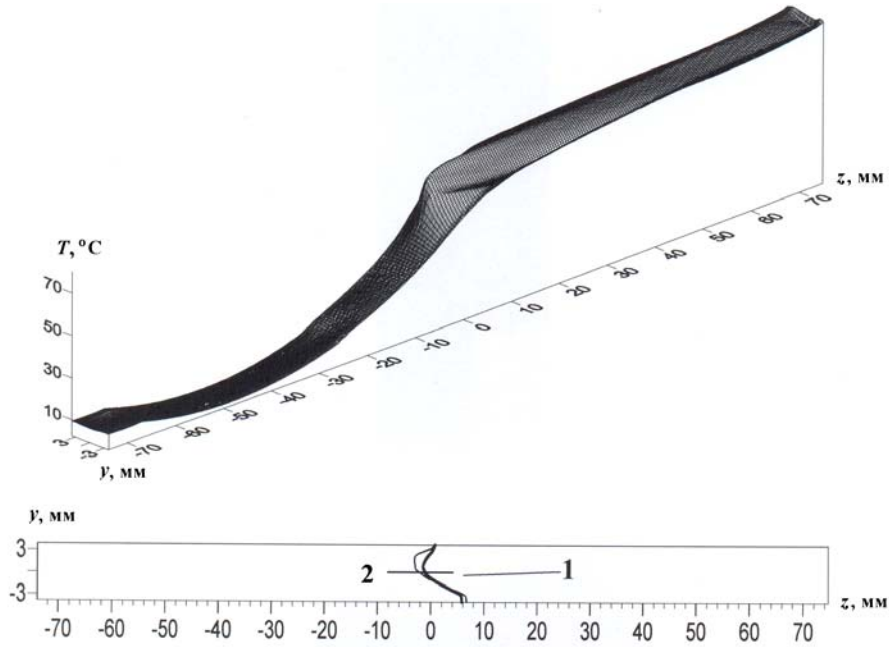


Рис. 14. Распределение температуры в сечении $(z, 0, y)$ и изотермы для случая кристаллизации: 1 — эксперимент; 2 — расчет

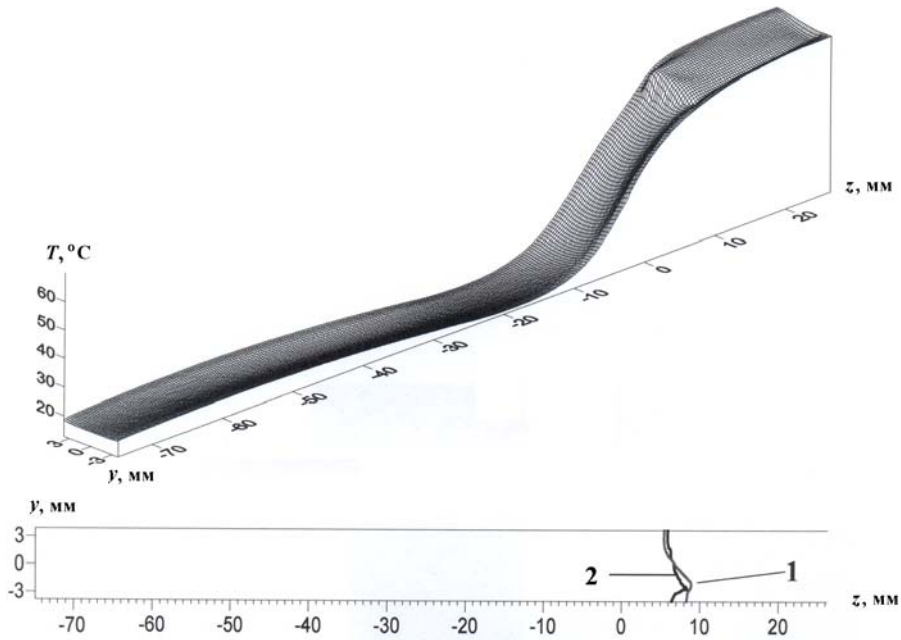


Рис. 15. Распределение температуры в сечении $(z, 0, y)$ и изотермы для случая плавления: 1 — эксперимент; 2 — расчет

результатов, хотя имеются несколько большие различия в форме границы фазового перехода, чем для стационарного случая.

Выводы

Разработан новый эффективный метод CGPIF для решения систем трехмерных конечно-разностных уравнений эллиптического типа с симметричными плохообусловленными матрицами коэффициентов. Показана высокая скорость сходимости метода при решении задач Дирихле и Неймана

для уравнения Пуассона на сетках с числом узлов до 10 млн. Для решения несимметричных задач предложен двухуровневый итерационный метод.

Предложена математическая модель для решения задачи Стефана в энтальпийных переменных. Выполнены расчеты экспериментальных бенчмарков с фазовым переходом, показавшие хорошее согласие расчетных и экспериментальных результатов по всей совокупности измеренных величин.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 06-02-16597).

Список литературы

1. Булеев Н. И. Численный метод решения двумерных и трехмерных уравнений диффузии // Математический сборник. Новая серия. Т. 51 (93):2. Изд-во АН СССР, 1960.
 2. Ginkin V. P., Kulik A. V., Naumenko O. M. An efficient preconditioning procedure in the conjugate gradient method for 3D HEX-Z geometry // Proc. of the 4-th Int. Conf. on Supercomputing in Nuclear Computations (SNA 2000). Tokyo, Japan, 2000.
 3. Гинкин В. П., Ганина С. М. Программа GIGAN для расчета трехмерной конвекции на сетках большой размерности // Тез. докл. IV Межд. конф. по неравновесным процессам в соплах и струях (NPNJ-2002). С.-Пб., 24—28 июня 2002 г. М.: Изд-во МАИ, 2002. С. 159—160.
 4. De Groh III H. C., Lindstrom T. Interface shape and convection during solidification and melting of succinonitrile // NASA Technical Memorandum 106487. 1994. <http://gltrs.grc.nasa.gov/reports/1994/TM-106487.pdf>.
 5. Ginkin V. Methods of solution of convective heat mass transfer at single crystal growth problem // Proc. of 2-nd Int. Symp. on Advances in Computational Heat Transfer. Palm Cove, Queensland, Australia. 20—25 May, 2001. P. 1161—1168.
-